



**HAL**  
open science

# Génération de réseaux moléculaires depuis la plateforme Workflow4Metabolomics

Nicolas Elie, Yann Guitton, David Touboul

► **To cite this version:**

Nicolas Elie, Yann Guitton, David Touboul. Génération de réseaux moléculaires depuis la plateforme Workflow4Metabolomics. Analytics 2022, Sep 2022, Nantes, France. 2022. hal-04264248

**HAL Id: hal-04264248**

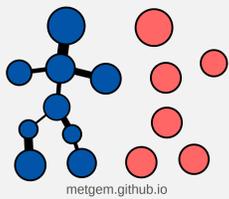
**<https://hal.science/hal-04264248>**

Submitted on 30 Oct 2023

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# GÉNÉRATION DE RÉSEAUX MOLÉCULAIRES



## DEPUIS LA PLATEFORME



# WORFLOW4METABOLOMICS

NICOLAS ELIE<sup>1</sup>, YANN GUITTON<sup>2</sup> ET DAVID TOUBOUL<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS UPR 2301, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay, Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France

<sup>2</sup> Oniris, INRAE, LABERCA, 44300 Nantes, France

INTRODUCTION

### Réseaux moléculaires :

- pleinement intégrés dans les démarches de déréplication de mélanges complexes
- accéder de manière visuelle et interactive à l'ensemble du jeu de données MS et MS/MS

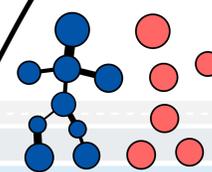
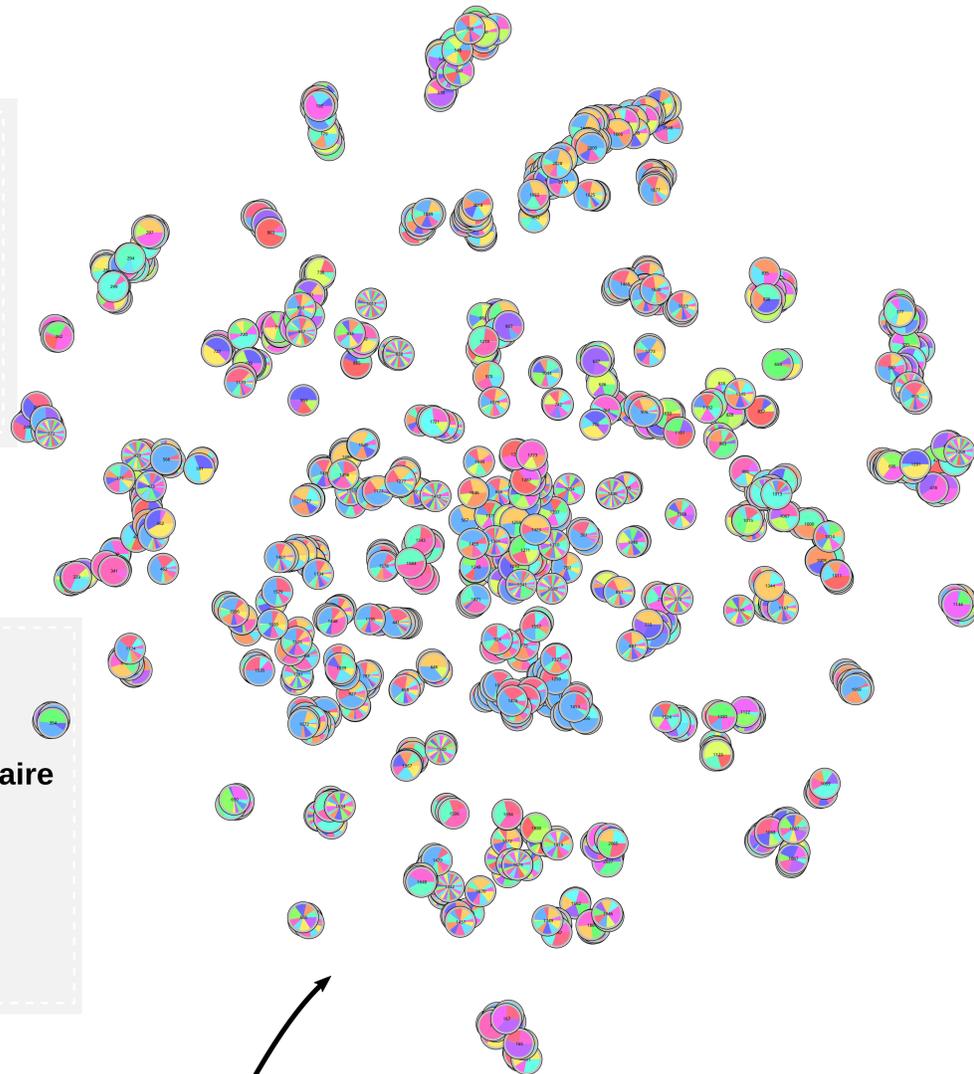
Plusieurs workflows disponibles pour extraire ou exporter les données MS et MS/MS :

- **MzMine2** est actuellement l'outil le plus populaire dans ce domaine
- **Workflow4Metabolomics (W4M)** offre de nombreux avantages en termes de programmation fine des opérations de traitement de données et la possibilité d'accès à un serveur dédié de calculs pour accélérer les tâches

Important d'explorer la possibilité d'interfacer **W4M** et **MetGem** afin d'offrir une solution intégrée à la communauté scientifique en métabolomique.

MATÉRIELS ET MÉTHODES

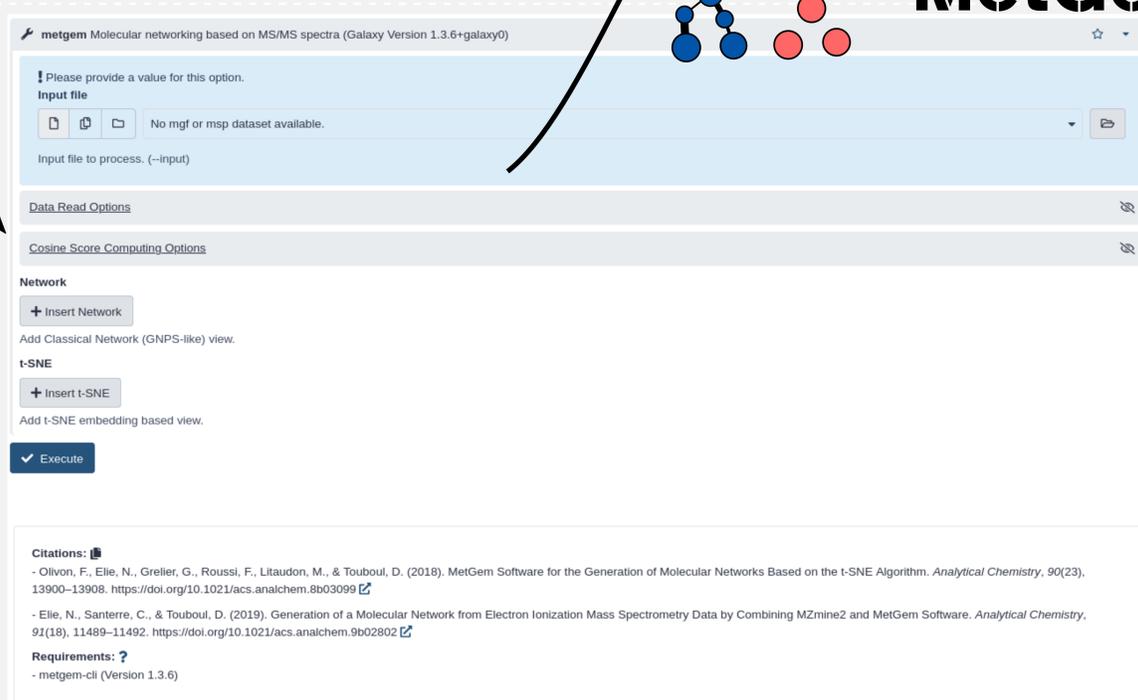
- Mise à jour de **MetGem** vers la version **1.4**
- Ajout possible d'autant de **visualisations que nécessaire**
- Développement d'une version en ligne de commande
- Création d'un **workflow W4M** qui interface MetGem



## MetGem



msPurity



metgem Molecular networking based on MS/MS spectra (Galaxy Version 1.3.6+galaxy0)

Please provide a value for this option.

Input file

Input file to process. (--input)

Data Read Options

Cosine Score Computing Options

Network

+ Insert Network

Add Classical Network (GNPS-like) view.

t-SNE

+ Insert t-SNE

Add t-SNE embedding based view.

Execute

Citations:

- Olivon, F., Elie, N., Grelier, G., Roussi, F., Litaudon, M., & Touboul, D. (2018). MetGem Software for the Generation of Molecular Networks Based on the t-SNE Algorithm. *Analytical Chemistry*, 90(23), 13900–13908. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.8b03099>

- Elie, N., Santerre, C., & Touboul, D. (2019). Generation of a Molecular Network from Electron Ionization Mass Spectrometry Data by Combining Mzmine2 and MetGem Software. *Analytical Chemistry*, 91(18), 11489–11492. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b02802>

Requirements: ?

- metgem-cli (Version 1.3.6)

RÉSULTATS ET DISCUSSION

- Intégration dans W4M permet de disposer d'un workflow complet pour générer des réseaux moléculaires
- Données brutes traitées par msPurity pour en extraire les features
- Features sont ensuite représentées sous la forme de réseaux moléculaires par MetGem
- **Accélération** des calculs grace à la puissance de calcul des serveurs W4M
- **Interactivité** de MetGem, notamment modification rapide des paramètres de visualisation sans avoir à recalculer les scores de similarité



### CONTACTS

nicolas.elie@cnrs.fr  
yann.guitton@oniris-nantes.fr  
david.touboul@cnrs.fr